量子グラフ序説 (量子科学における双対性とスケール)

AUTHOR(S):

全, 卓樹

数理解析研究所講究録
第 1705 巻 2010 年 30-41

量子グラフ序説

高知工科大学・理論物理研究室　全卓樹（Taksu Cheon）
Laboratory of Physics, Kochi University of Technology

1　はじめに

一次元的なグラフ上に制限された量子的な粒子の運動を探るという試みは、もともとは芳香属炭水化物の研究という具体的問題に発するものであった。しかし量子化学の ab initio 計算万能の時代の到来とともに、この目的は失われて、以降長い間、グラフの量子論というのは珍奇な演習問題のように考えられて来た。

この状況が変わったのは、微細加工の視野にミクロン以下のグラフ状の構造物の制作が入って来た２０年ほど前である。それ以来、再び市民権を得たグラフの量子論は、その実際的応用もさることながら、量子系の様々な（奇妙な）特性を探るための格好の理論的モデルとして注目されるようになってきた。

量子グラフを特徴づける物理量は、グラフの各線分の波動関数の節点（ノード）における接続である。一つのノードから N 本の半直線が出ているものを次数 N の星形グラフと呼ぶとすれば、そのうえでの量子論こそが量子グラフの素要素を与える。

これまでの通例では、星形グラフの接続条件のうちで、もっとも単純なもの達のみを考えて来た。それは往々にしていわゆる「自由接続（キルヒホフ接続）」、「ノイマン接続」だけであった。それに加えて、時に「一般化されたデルタ型」、「一般化されたデルタプライム型」も扱われることがあった。これはそれぞれ、節点に於いて全ての線分からの波動関数が同じ値をとり、波動関数の微分の和がその波動関数の定数倍（デルタ）、もしくは節点に於いて全ての線分からの波動関数の微分が同じ値をとり、波動関数の和がその微分の定数倍（デルタプライム）、というものであった。これらはより一般的な接続条件の特殊な場合に当たる事は知られており、そのより一般的な条件自体も、その数学的な規定（ラプラシアンが節点を取り去ったグラフ状のすべての点に於いて自己共役である）、その物理的な意味（ノードにおいて確率密度の流速の流入と流出が等しい）は知られており、さらには行列によるノードの接続条件の形式的な規定もまた、 Kostrykin と Schrader により、さらには少し異なった方法で Fulop と Tsutsui により、すでになされている。これまでに未だ達成されてない事は、星形グラフの一般的な接続条件に内包されている、物理的内実の探求である。

次数 N の星形グラフを規定するのは二つの $N \times N$ 行列であって、含まれる独立パラメータの数は N^2 と膨大であり、物理的内実を探るには、この膨大なパラメータ空間を区分けし整理し、特殊な場合簡単な場合を抽出するための手法を考える必要がある。最近 Cheon、Exner、Turek の研究によって、その点におけるブレイクスルーがなされた。それは接続条件を規定する二つの行列の階数による縮小を考えることによって達成された。それにより、

いかなる場合にパラメータの数が減少し、接続条件が簡易なものに帰着するかを、組織的に調べる事が可能になったのである。ここではその Cheon-Exnet-Turek の縮小を、N=2 および N=3 の具体例に適用して、詳細に見て行く事をおこなう。

$N=2$、即ち直線上の量子的点状相互作用では、これまでに知られている「デルタ」と「デルタプライム」の組み合わせが、今回の行列の階数による新しい分類を用いてきれいに分類される事を見る。そしてこの話の中心であるN=3の場合、即ちY型グラフの量子論にあっては、この新しい分類によって、始めてその物理的内実を垣間みることができるようになった。具体的には、Y型グラフを構成する3つの半直線の任意のペアの間のつながりごと個別に、デルタ的、およびデルタプライム的に構成する事が可能であることが示された。それによって特に三つの可能なペアで、全てがデルタ型のもの、全てがデルタプライム型のものと言うこれまでに知られていたものに加えて、二つがデルタ型で一つがデルタプライム型のもの、また二つがデルタプライム型で一つがデルタ型のものをように構成することができた。

その結果、グラフにおける量子粒子の透過をみると、高周波を通すデルタと、低周波を通すデルタプライムの性質から、一つの半直線からの入射粒子のうち、低周波のものは第二の半直線に透過し、高周波のものは第三の半直線を透過して行くというものを構成する事が可能になった。すなわち量子的スペクトル分岐フィルターをデザインする事についに成功した訳である。

本稿では以下、次の第二節において Cheon-Exner-Turek の階数に応じた接続行列縮約法を解説し、第三節において星形グラフにおける散乱行列の計算法考え、第四節においてN=2の直線上の点状相互作用を改めて新しい目で見てみる。本稿の中心をなす第五節においてN=3のY型グラフの分類とその物理的内容の精査を行なう。そこでデルタ型、デルタプライム型と並んで、デルタ＝デルタ＝デルタプライム型、デルタ＝デルタプライム＝デルタプライム型が特に考察されて、そのスペクトル分岐フィルターとしての用途が明確にされる。第六節でまとめと将来の課題の検討が行われる。

2　位数による接続行列縮約

N 次の星形グラフ（図1）上の量子的粒子の運動を考える。グラフ上の節点以外の点では粒子は自由運動をすると考える。すると全ての物理は節点での波動関数の接続条件に集約されることになる。

節点においては確率密度流速が流入するものと流出するもので釣り合っていなければならない。いま j 番目の半直線の座標を節点を原点として x_j で表し、そのうえでの波動関数を $\phi_j(x_j)$、その微分を $\phi'_j(x_j)$ で表すことにする。それらの節点での値 $\phi_j(0)$、$\phi'_j(0)$ を、簡単のため ϕ_j、ϕ'_j と表記し、それらから作ったベクトル

$$\Psi=\begin{pmatrix}\phi_1\\ \vdots\\ \phi_N\end{pmatrix},\quad \Psi'=\begin{pmatrix}\phi'_1\\ \vdots\\ \phi'_N\end{pmatrix},$$

を考えると、確率密度流速保存の条件は

$$\Psi^\dagger\Psi'-\Psi'^\dagger\Psi=0$$

とかける。これは A 、 B を $N\times N$ の行列で $rank(AB)=N$ かつ $A^\dagger B - B^\dagger A = 0$ の性質を満たすものを用いた次の線形条件

$$A\Psi + B\Psi' = 0$$

同等である。この構成から、明らかに A B のなかには N^2 個の実数だけ独立なパラメータがある。この一般的な接続条件は、行列 A および B の階数が、その最大値の N より小さいとき、そしてその時に限り簡略化することができる。ここでは $r_A = rank(A)$、 $r_B = rank(B)$ という表記も用いることにする。行列 A、B は条件 (1) の内実を変えずに、次の形に変形することができる。

$$A = \begin{pmatrix} S & 0 \\ -T^\dagger & I^{(N-r_B} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} I^{(r_B} & T \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ここで S は $r_B\times r_B$ 次元のエルミート行列で、T は $r_B\times(N-r_B)$ 次元の複素行列である。ここで行列 S の階数 r_S は一般には r_B 以下の何らかの数であり、$r_S<r_B$ の場合は、S の左上 $r_S\times r_S$ だけにゼロでない要素を集め、残りはゼロにすることができる。

今の操作は r_A と r_B を置き換えて考えれば、A と B を逆にして行うこともでき、そのばあい、 (1) と同じ物理系が

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} I^{(r_A} & \bar{T} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{B} = \begin{pmatrix} \bar{S} & 0 \\ -\bar{T}^\dagger & I^{(N-r_A} \end{pmatrix},$$

を用いて

$$\bar{A}\Psi + \bar{B}\Psi' = 0$$

の接続条件で表されることになる。 このとき $\bar{S}$ は $r_A\times r_A$ 次元のエルミート行列、T は $r_A\times(N-r_A)$ 次元の複素行列である。 $\bar{S}$ の階数 $r_{\bar{S}} = rank(\bar{S}$ を考えると、これは r_S と等しく、さらに A、 B、S の階数の間には関係

$$r_A + r_B = N + r_S$$

があることが簡単に示せる。

このようにして r_A および r_B が N より小さい場合には、接続条件の縮約簡易化が可能であり、独立なパラメータの数は $N^2+(N-r_A)^2+(N-r_B)^2$ に減少することが分かる。

3 散乱行列

前節で調べた接続条件から、星形量子グラフの物理的性質を導くために、もっとも都合がよいのは散乱行列を求めることである。すなわち任意の半直線から入射する進行波が、節点における散乱により、どのように拡販直線に振り分けられて透過し、反射されるかをみるのである。いま j 番目の半直線から波数 k の進行波が入射する状況を考えると、各半直線上の波動関数は

$$\phi_j^{(j)} = e^{-ikx_j} + \mathcal{R}_j e^{ikx_j}$$

$$\phi_i^{(j)} = \mathcal{T}_{ij} e^{ikx_i} \quad (i \neq j)$$

とかけて、$\mathcal{R}_j$ が半直線 j 上の反射振幅、$\mathcal{T}_{ij}$ が半直線 j から i への透過振幅である。異なった入射半直線 j の場合の節点での波動関数 $\phi_i^{(j)}$ および $\phi_i'^{(j)}$ から作ったベクトル $\Psi^{(j)}$ と $\Psi'^{(j)}$ を用いて、$N \times N$ 次元の行列

$$(\Psi^{(1)} \cdots \Psi^{(n)}) = \mathcal{S}(k) + I$$

$$(\Psi'^{(1)} \cdots \Psi'^{(n)}) = \mathrm{i}k(\mathcal{S}(k) - I)$$

作ることで、反射振幅と透過振幅から次のように構成した散乱行列 $\mathcal{S}$

$$\mathcal{S}(k) = \begin{pmatrix} \mathcal{R}_1(k) & \mathcal{T}_{12}(k) & \cdots & \mathcal{T}_{1n}(k) \\ \mathcal{T}_{21}(k) & \mathcal{R}_2(k) & \cdots & \mathcal{T}_{2n}(k) \\ \vdots & & & \vdots \\ \mathcal{T}_{n1}(k) & \mathcal{T}_{n2}(k) & \cdots & \mathcal{R}_n(k) \end{pmatrix}$$

を A および B で次のように書き下すことができる。

$$\mathcal{S}(k) = -\frac{1}{A + ikB}(A - ikB)$$

行列 A および B の階数が N 以下で縮約形が用いられれば、当然ながら、この表現の計算は容易になり見通しが良くなる。

4　N = 2の場合

星形グラフの $N = 2$ の場合とは、一直線上の点状相互作用に他ならない。この場合については、すでに Tsutsui、Fulop、Cheon らによる詳細な研究があって、物理的内実は精査されている。その要点は、一直線上の量子的点状相互作用は、性質の対極的なデルタ型、デルタプライム型を組み合わせとして考えることができて、それに位相の変化をもたらす点状の磁場と、入射粒子のエネルギーによらない反射透過率の振り分けを与える Fulop-Tsutsui 型のスケール不変な成分で補足したものだとみなせる、というものである。ここでは前節で導入した A と B の階数による縮約にもとづいた分類が、$N = 2$ に具体的に適用されると、まさに量子点状相互作用のそのような物理的内容を、自動的に見通し良く整理してくれることを示す。

階数の間の関係式を考え、まず r_S を定め、しかる後に r_A、r_B の可能な組み合わせを考えると、次のようになる。

$$r_S = 0 : (r_A, r_B) = (2,0), (1,1), (0,2)$$

$$r_S = 1 : (r_A, r_B) = (2,1), (1,2)$$

$$r_S = 2 : (r_A, r_B) = (2,2)$$

このうち $r_S=0$ のなかの $r_A=0$ および $r_B=0$ のものは、それぞれ

$$\begin{pmatrix}\phi_1'\\ \phi_2'\end{pmatrix}=0,\quad \begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}=0$$

を与えて、それぞれ Dirichlet 境界、Neumann 境界にて、点状相互作用の左右が分離して確率密度流速の通行がない分断された状況を表している。無限強度のデルタ関数、デルタプライム関数といってもよい。

$S=0$ の残りのもの $r_A=r_B=1$ の接続条件を書き下すと、複素数 t をパラメータに

$$\begin{pmatrix}1 & t\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1'\\ \phi_2'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 0\\ -t^* & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}$$

となり、節点の左右で波動関数とその微分が定数 t、t^* でスケールしている、いわゆる Fulop-Tsutsui のスケール不変な点状相互作用になっていることが分かる。このときの透過係数を求めると

$$\mathcal{T}_{21}=\frac{2t^*}{|t|^2-1}$$

となって、これは t によって定まる一定の比率での、入射波数によらない一種の量子的半透膜のような性質を持つものとわかる。そして $t=1$ と選んだ場合が相互作用のない「自由結合」となるのである。

ついで $r_S=1$ をみると、物理的に興味深いデルタ、およびデルタプライム相互作用が、ここに出てきていることが次のようにして分かる。まずこのケースの二つの場合の一つである $r_A=2$、$r_B=1$ の境界条件を書いてみると

$$\begin{pmatrix}1 & t\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1'\\ \phi_2'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}s & 0\\ -t^* & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}$$

となるが、簡単のため $t=1$ と置くと、これは

$$\phi_1'+\phi_2'=s\phi_1=s\phi_2$$

となって、波動関数は連続でその導関数に飛びの出るデルタ相互作用となっている。透過振幅は

$$\mathcal{T}_{12}=\frac{2kt}{k(1+tt^*)+is}$$

と低周波フィルターになり、期待通りデルタ特有の性質を示している。ついでこのケースの二つ目である $r_A=1$、$r_B=2$ の境界条件を書いてみると、A を縮約した型を用いて

$$\begin{pmatrix}\bar{s} & 0\\ -\bar{t}^* & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1'\\ \phi_2'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & \bar{t}\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}$$

であり、さらに簡単のため $\bar{t}=1$ と置くと、これは

$$\phi_1+\phi_2=\bar{s}\phi_1'=s\phi_2'$$

となって、波動関数の導関数が連続で波動関数自体に飛びの出るデルタプライム相互作用となっている。透過振幅は

$$\mathcal{T}_{12} = \frac{-2\bar{t}}{(1+tt^*)+ik\bar{s}}$$

と高周波フィルターとなって、デルタプライム特有の性質を示している。

最後に $r_S = 2$ をみると、このときの A と B の階数は $r_A = r_B = 2$ になっていて、接続条件は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1' \\ \phi_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12}^* & s_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

で与えられ、透過係数を前節の公式によって書き下すと

$$\mathcal{T}_{12}(k) = \frac{2ks_{12}}{ik^2 - k\,\mathrm{tr}[S] - i\,\det[S]}$$

となる。$k \to 0$ および $k \to \infty$ の両極限で $\mathcal{T}_{21}(k) \to 0$ となっており、ある特定の波数のみを透過させ、高周波極限、低周波極限の両方をブロックする。これはデルタとデルタプライムの両方の混合的な性質を持つ点状相互作用の存在を示している。

5　N = 3 の場合：その1、二種のフロップ筒井

本稿の本来の主題である $N = 3$ 星形グラフは、その形状からＹグラフ、Ｙ接合などとも称される。前節でみた直線上の点状相互作用に、もう一本半直線を加えただけのものであるが、この場合については、詳細はほとんど何も分析されていない。一般的な場合で９パラメータ、時間反転不変をあらわす、磁場不在の実数型の接続条件に限っても６パラメータの問題であり、これをそのままに物理的な見通しの良い解析をするのは事実上不可能であったためである。

Cheon-Exner-Turek の行列縮約による分類解析は、この状況の改善に、まさにおあつらえ向きのものであることを、本節で示す。主要な物理的な結果は二段に分けて考えることができる。まず最初の重要な点は Cheon-Exner-Turek の原論文の構成法を見れば陽に示されていることであるが、星形グラフの接続条件を任意の二線分の間の結合を集めたものとして理解できることである。これは言いかえれば量子グラフにあっては、任意の線分から、節点を共有する他の任意の線分への結合相互作用を個別にチューニング可能ということである。

物理的に次に重要なのは、行列の階数による縮約で、物理的意味のはっきりした小さな数のパラメータ族の同定が可能になる点である。具体的には $N = 2$ の場合と類似に、$r_S = 1$ の接続条件の中に、Ｙグラフの三つの半直線の間の結合が、すべてデルタ型のもの、すべてデルタプライム型のものとならんで、二つがデルタ型で一つがデルタプライム型、また二つがデルタプライム型で一つがデルタ型のものを同定することができたのである。高周波フィルタとしてのデルタ、低周波フィルタとしてのデルタプライムの性質を思い起こせば、これら混合型の接続条件が、低周波は一方の半直線へ、高周波は他方の半直線へ、というスペクトル分岐フィルターの機能を持つことが容易に推測されるが、それは透過振幅の計算でその通りであることを示すことができるのである。

さて前節の $N=2$ の場合と平行して、$N=3$ の場合について、階数の間の関係式を考え、まず r_S を定め、しかる後に r_A、r_B の可能な組み合わせを考えると、次のようになる。

$$r_S = 0 : (r_A, r_B) = (3,0), (2,1), (1,2), (0,3)$$
$$r_S = 1 : (r_A, r_B) = (3,1), (2,2), (1,3)$$
$$r_S = 2 : (r_A, r_B) = (3,2), (2,3)$$
$$r_S = 3 : (r_A, r_B) = (3,3)$$

このうち $r_S = 0$ 　のなかの　$r_A = 0$ および　$r_B = 0$ のものは、 それぞれ

$$\begin{pmatrix} \phi'_1 \\ \phi'_2 \\ \phi'_3 \end{pmatrix} = 0, \quad \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix} = 0$$

を与えて、各々 Dirichlet 境界、Neumann 境界にてすべての半直線が分離して確率密度流速の通行がない分断された状況を表している。$N=3$ に拡張された無限強度のデルタ関数、デルタプライム関数に相当している。

$S=0$ の残りのものの一つ $r_A = 2, r_B = 1$ の接続条件を書き下すと、二つの複素数 t_2、t_3 をパラメータに

$$\begin{pmatrix} 1 & t_2 & t_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi'_1 \\ \phi'_2 \\ \phi'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -t_2^* & 1 & 0 \\ -t_3^* & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix}$$

となり、節点において三つの半直線の波動関数が t_2^*、 t_3^* でスケールしている、 スケール不変ないわば $N=3$ に拡張された Fulop-Tsutsui になっていることが分かる。このときの透過係数を求めると

$$\mathcal{T}_{21} = \frac{2t_2^*}{1 + t_2^* t_2 + t_3^* t_3}, \quad \mathcal{T}_{31} = \frac{2t_3^*}{1 + t_2^* t_2 + t_3^* t_3}$$

となって、係数 t_2、t_3 によって定まる一定の比率での、入射波数によらない量子的波動分岐装置の性質を持つものとわかる。

$S=0$ で残った最後のもの $r_A = 1, r_B = 2$ の接続条件を書き下すと、二つの複素数 $\bar{t}_2$、$\bar{t}_3$ をパラメータに

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\bar{t}_2^* & 1 & 0 \\ -\bar{t}_3^* & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi'_1 \\ \phi'_2 \\ \phi'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \bar{t}_2 & \bar{t}_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix}$$

となり、節点において三つの半直線の波動関数の微分が $\bar{t}_2^*$、 $\bar{t}_3^*$ でスケールしている、 これもスケール不変な接続であり、$N=3$ に拡張された Fulop-Tsutsui の第二種ともいうべきもの になっていることが分かる。このときの透過係数を求めると

$$\mathcal{T}_{21} = \frac{2\bar{t}_2^*}{1 + \bar{t}_2^* \bar{t}_2 + \bar{t}_3^* \bar{t}_3}, \quad \mathcal{T}_{31} = \frac{2\bar{t}_3^*}{1 + \bar{t}_2^* \bar{t}_2 + \bar{t}_3^* \bar{t}_3}$$

となって、これも係数 $\bar{t}_2$、$\bar{t}_3$ によって定まる一定の比率での、入射波数によらない量子的波動分岐装置の性質を持つものとわかる。結局、何ゆえか $N=3$ には二種類の Fulop-Tsutsui が見つかるのである。それに対応して上記の t パラメータすべてを 1 に選んだときに、「自由結合」に相当するものが二種類見つかることになる。

6　N=3の場合：その2、デルタとデルタプライム、スペクトル分岐フィルター

さて、ここからが本稿の白眉となる。N=3 の星形グラフ、すなわちYグラフにおいて、行列縮約形を $r_S=1$ について調べてみる。このとき $r_A+r_B=4$ を満たす 0 以上 3 以下の r_A、r_B が許されるので、それを $(r_A,r_B)=(3,1)$、$(r_A,r_B)=(1,3)$、$(r_A,r_B)=(2,2)$ の順で見てゆこう。

最初のもの $(r_A,r_B)=(3,1)$ が、3つの半直線すべてが節点でデルタで結合したものである。そして次のもの $(r_A,r_B)=(1,3)$　が 3 つの半直線すべてが節点でデルタプライムで結合したものになっている。そして三つ目のもの、$(r_A,r_B)=(2,2)$ は結合がデルタとデルタプライムの混合形なのであるが、そのなかでしかるべきパラメータを 0 とした二つのサブセットがみつかる。その一つが、それぞれ三つの半直線間の二つの組み合わせはデルタ型結合で残りの一つがデルタプライムであるような接続条件を与える。そして他の一つが、それぞれ三つの半直線間の二つの組み合わせはデルタプライム型結合で残りの一つがデルタであるような接続条件を与える。

これらは両方とも、低周波はあちらを透過、高周波はこちらを透過という振る舞いを見せるのである。これこそが量子的周波数分岐フィルターであって、これは単一量子トランジスターの設計にもつながるものと考えられる。

まず最初に、 $r_A=3$、 $r_B=1$ の接続条件をみると

$$\begin{pmatrix}1 & t_2 & t_3\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1'\\ \phi_2'\\ \phi_3'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}s & 0 & 0\\ -t_2^* & 1 & 0\\ -t_3^* & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\\ \phi_3\end{pmatrix}$$

となる。また本質を変えずに簡単にするため $t_2=t_3=1$ と置くと、これは

$$\phi_1'+\phi_2'+\phi_3'=s\phi_1=s\phi_2=s\phi_3$$

となって、波動関数はどの半直線からみても同じで、その導関数の和をみると、「自由接続」からのずれが、パラメータ s と節点での波動関数の大きさとの積で与えられている。これは $N=2$ でのデルタ相互作用のYグラフでの自然な拡張とみなせる。透過振幅は

$$\mathcal{T}_{12}=\frac{2kt_2}{k(1+t_2t_2^*+t_3t_3^*)+is},$$

$$\mathcal{T}_{23}=\frac{2kt_2^*t_3}{k(1+t_2t_2^*+t_3t_3^*)+is},$$

$$\mathcal{T}_{31} = \frac{2kt_3^*}{k(1 + t_2 t_2^* + t_3 t_3^*) + is},$$

となってどの半直線からどの半直線へも、高周波だけを通過させる様子が見て取れる。デルタ型という呼び名に頷首されよう。

つづいて、 $r_A = 1$、 $r_B = 3$ の接続条件をみると

$$\begin{pmatrix} \bar{s} & 0 & 0 \\ -\bar{t}_2^* & 1 & 0 \\ -\bar{t}_3^* & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1' \\ \phi_2' \\ \phi_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \bar{t}_2 & \bar{t}_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix}$$

となる。またまた話を簡単にするため $\bar{t}_2 = \bar{t}_3 = 1$ と置くと、これは

$$\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 = \bar{s}\phi_1' = \bar{s}\phi_2' = \bar{s}\phi_3'$$

となって、波動関数の導関数はどの半直線からみても同じで、その波動関数の和の「自由接続」からのずれが、パラメータ $\bar{s}$ と節点での波動関数の導関数大きさとの積で与えられている。これは $N = 2$ でのデルタプライム相互作用のＹグラフでの自然な拡張とみなせる。透過振幅は

$$\mathcal{T}_{12} = \frac{2\bar{t}_2}{(1 + \bar{t}_2\bar{t}_2^* + \bar{t}_3\bar{t}_3^*) - iks},$$

$$\mathcal{T}_{23} = \frac{2\bar{t}_2^*\bar{t}_3}{(1 + \bar{t}_2\bar{t}_2^* + \bar{t}_3\bar{t}_3^*) - iks},$$

$$\mathcal{T}_{31} = \frac{2\bar{t}_3^*}{(1 + \bar{t}_2\bar{t}_2^* + \bar{t}_3\bar{t}_3^*) - iks},$$

となってどの半直線からどの半直線へも、低周波だけを通過させる様子が見て取れる。デルタプライム型という呼び名が納得できるであろう。

さてわれわれにとって $r_S = 1$ の最後の場合である、 $r_A = 2$、 $r_B = 2$ の接続条件にようやく辿りついた。それは次のように書ける

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & t_1 \\ 0 & 1 & t_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1' \\ \phi_2' \\ \phi_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s & cs & 0 \\ c^*s & c^*cs & 0 \\ -t_1^* & -t_2^* & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix}$$

それはまた、少し異なったパラメータ $\bar{s} = 1/s$、 $\bar{c} = t_1$、 $\bar{t}_1 = c$ そして $\bar{t}_3 = ct_1^* - t_2^*$ を用いて、次のようにもかける

$$\begin{pmatrix} \bar{s} & \bar{c}\bar{s} & 0 \\ \bar{c}^*\bar{s} & \bar{c}^*\bar{c}\bar{s} & 0 \\ -\bar{t}_1^* & -\bar{t}_2^* & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1' \\ \phi_3' \\ \phi_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \bar{t}_1 \\ 0 & 1 & \bar{t}_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_3 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

となる。この後の式では ϕ_2 と ϕ_3 が入れ替わっていること注意せよ。この接続条件で与えられるＹグラフの透過振幅は

$$\mathcal{T}_{12}(k) = \frac{-2t_2^* t_1 k - 2\mathrm{i}cs}{D_1 k + \mathrm{i}sD_0},$$
$$\mathcal{T}_{23}(k) = \frac{2t_2 k - 2\mathrm{i}s(c^* t_1 - t_2)}{D_1 k + \mathrm{i}sD_0},$$
$$\mathcal{T}_{31}(k) = \frac{2t_1^* k + 2\mathrm{i}c^* s(ct_1^* - t_2^*)}{D_1 k + \mathrm{i}sD_0},$$

と求まるが、ここで D_0、D_1 は

$$D_0 = 1 + c^* c + (ct_1^* - t_2^*)(c^* t_1 - t_2),$$

$$D_1 = 1 + t_1^* t_1 + t_2^* t_2,$$

と定義されている。このままでは高派数極限も低波数極限も透過はゼロで、デルタとデルタプライムの両方が入っているとしか言えない。

ここで二つの特別な場合を考えてみる。まず最初に $ct_1^* - t_2^* = 0$ としてみる。$\bar{t}_3 = 0$ といっても同等である。そして s は（たとえば $t_1^* t_1$ に比して）十分大きいとする。さらにいつもの通り、簡単にするため $t_1 = t_2 = 0$ と選ぶと、接続条件は

$$\phi_1' + \phi_3' = \phi_2' + \phi_3' = s\phi_3,$$

$$\phi_3 = \phi_1 + \phi_2,$$
$$\phi_1' = \phi_2'.$$

最後のものは独立ではないが、物理的意味がわかりやすくなるので加えてある。すなわち半直線１と２の間では結合はデルタプライム的に見える。一方最初の式をみると、１と３、および２と３の間はデルタ的な結合に見えている。この意味つけは透過振幅の低波数極限が

$$\mathcal{T}_{31}(k) \to 0, \quad \mathcal{T}_{23}(k) \to 0 \quad (k \to 0)$$

であたえられ、高波数極限が s が十分大きければ、近似的に

$$\mathcal{T}_{12}(k) \to 0 \quad (k \to \infty)$$

で与えられることを見ても正当化される。こうして、求めていたスペクトル分岐フィルターが「デルタ＝デルタ＝デルタプライム結合をしたＹグラフ」として、ついに得られたことになる。

さて $r_A = 2$、$r_B = 2$ のうちの、二つ目の特別な例として、今度は $t_1 = 0$ としてみる。そして $\bar{s}$ は（１に比べ）非常に大きいとする。条件としては本来これで十分なのだが、さらにまたいつもの通り、簡単にするため $t_1 = c = 1$ と選ぶ。節点での接続条件は

$$\phi_1 + \phi_2 = \phi_3 + \phi_2 = \bar{s}\phi_2',$$

$$\phi_2' = \phi_1' + \phi_3',$$
$$\phi_1 = \phi_3.$$

最後のものは独立ではないが、物理的意味がわかりやすくなるので加えてある。すなわち半直線1と3の間では結合はデルタプライム的に見える。一方最初の式をみると、1と3、および2と3の間はデルタ的な結合に見えている。この意味つけは透過振幅の高波数極限が

$$\mathcal{T}_{12}(k) \to 0, \quad \mathcal{T}_{23}(k) \to 0 \quad (k \to \infty)$$

であたえられ、低波数極限が $\bar{s}$ が十分大きければ、近似的に

$$\mathcal{T}_{31}(k) \to 0 \quad (k \to 0)$$

で与えられることを見ても正当化される。こうして、こうしてまた再びスペクトル分岐フィルターが今度は「デルタプライム＝デルタプライム＝デルタ結合をしたYグラフ」として得られたことになる。

同様な分析が $r_S = 2$ おyび $r_S = 3$ についてもおこなえるが、ここではもうこれ以上詳説せず、ただこれらの場合は、すべての半直線の間にデルタとデルタプライムの混合が見られ、これは物理的には特定周波数フィルターになっているという事実の指摘だけにとどめ置くことにしよう。詳細を知りたい読者は Cheon-Exnet-Turek の原論文に当たられたい。

7 まとめと展望

このようにして、階数縮約の手法の適用によって、量子グラフの物理を、これまでの $N=2$ だけの分析や、単純な「自由結合」や「デルタ結合」だけに選んでの分析という恣意的な選択から解放して、より一般的かつ物理的内容の豊富な系の分析が可能となったわけである。

今後の課題としてはいくつかの方向が考えられる。一つは今のアプローチの延長として、個別の例をつぶしていくやり方である。$N=4$ の「Xグラフ」は、そこにあるかもしれないさらなる豊富さを考えれば、理論的にも将来の実用を考えても興味深いので、これを今のYグラフと同様の、詳細な個別分析にかけるのは、手間がかかることが予想されるが、いずれやってみるべきことであろう。

もう一つの方向は、ここでは全く触れなかった、節点が大きさを持たない数学的な対象物である星形グラフを、実際の大きさの有る有限作用距離のポテンシャルから作り上げる問題である。実はこれについても Cheon-Exner-Turek が、デルタから出発する一般的な構成法を示している。これをYグラフ、さらにはXグラフで、縮約した場合ごとに、具体的な係数を持っておこなうことは、今後に残された課題である。グラフの量子論が実験的な検証や応用の段階に達したときには、これはいずれにせよ必須となるものである。

最後にわれわれは、グラフの量子論の整備のそのもそもの目的であったことの一つ、すなわち、さまざまな特異な量子現象の、できうる限り単純な「可解モデル」による実験室としての側面をもう一度強調したいと思う。それにはたとえば量子ホロノミの探求のモデルとして、また量子情報操作のモデルとして、さらには量子カオスのモデルとして、等々、量子グラフの多様な用途が考えられるべきであろう。

References

[1] P. Exner, J.P. Keating, P. Kuchment, T. Sunada, A. Teplyaev, eds.: *Analysis on Graphs and Applications*, Proceedings of a Isaac Newton Institute programme, January 8–June 29, 2007; 670 p.; AMS "Proceedings of Symposia in Pure Mathematics" Series, vol. 77, Providence, R.I., 2008.

[2] V. Kostrykin, R. Schrader, J. Phys. A: Math. Gen. **32** (1999) 595-630.

[3] M. Harmer, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000), 9193-9203.

[4] V. Kostrykin, R. Schrader, Fortschr. Phys. **48** (2000), 703-716.

[5] T. Fülöp and I. Tsutsui, Phys. Lett. **A264** (2000) 366–374.

[6] I. Tsutsui, T. Fülöp and T. Cheon, J. Math. Phys. **42** (2001) 5687-5697.

[7] P. Exner, J. Phys. A: Math. Gen. **29** (1996) 87-102.

[8] T. Cheon and T. Shigehara, Phys. Lett. A **243** (1998) 111-116.

[9] P. Exner and O. Turek, Rev. Math. Phys. **19** (2007) 571-606.

[10] P. Kuchment, Waves and Random Media **14** (2004) S107-S128.

[11] T. Cheon, P. Exner and O. Turek, J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 124004 (7p).

[12] T. Cheon, P. Exner and O. Turek, Ann. of Phys. (NY) **324** (2010) 1340-1359.